

当前位置: 科技频道首页 >> 军民两用 >> 计算机与网络 >> 原子间相互作用势库及其对复杂材料的应用

请输入查询关键词

科技频道

搜索

原子间相互作用势库及其对复杂材料的应用

关键词: [原子](#) [相互作用势](#) [固体物理](#) [能带理论](#) [数据库](#)

所属年份: 2001

成果类型: 应用技术

所处阶段:

成果体现形式:

知识产权形式:

项目合作方式:

成果完成单位: 北京科技大学

成果摘要:

该项目在系列性第一性原理能带计算基础上依据晶格反演理论建立起500种以上有效原子间相互作用势库, 并与MSI的Cerius2软件包相结合, 成为在原子级尺度上进行材料模拟设计的有力工具。并在三体势、离子晶体中的离子-离子势、界面材料中的离子-原子势方面进行了创新性探索。运用势库对国家高技术新材料领域的一系列重点问题进行试点研究, 其中用计算机模拟设计方法, 得到新型稀土化合物4:41相结构, 并指导实验, 获得初步证实。有中国特色的势库建设将在材料微观结构设计工作中发挥重要作用。

成果完成人:

[完整信息](#)

行业资讯

- [新疆综合信息服务平台](#)
- [准噶尔盆地天然气勘探目标评价](#)
- [维哈柯俄多文种操作系统FOR ...](#)
- [社会保险信息管理系统](#)
- [塔里木石油勘探开发指挥部广...](#)
- [四合一多功能信息管理卡MISA...](#)
- [数字键盘中文输入技术的研究](#)
- [软开关高效无声计算机电源](#)
- [邮政报刊发行订销业务计算机...](#)
- [新疆主要农作物与牧草生长发...](#)

成果交流

推荐成果

- [· 液压负载模拟器](#) 04-23
- [· 新一代空中交通服务平台、关...](#) 04-23
- [· Adhoc网络中的QoS保证\(Wirel...](#) 04-23
- [· 电信增值网业务创意的构思与开发](#) 04-23
- [· 飞腾V基本图形库的研究与开发...](#) 04-23
- [· ChinaNet国际\(国内\)互联的策...](#) 04-23
- [· 电信企业客户关系管理\(CRM\)系...](#) 04-23
- [· “易点通” 餐饮管理系统YDT2003](#) 04-23
- [· MEMS部件设计仿真库系统](#) 04-23

Google提供的广告

>> 信息发布